

# Impostor-based Analytical Approach for Molecular Surface Representation

R. Purwoko Cahyo Nugroho  
School of Electrical Engineering and Informatics  
Institut Teknologi Bandung  
Bandung, Indonesia  
rprwk.nugroho@hotmail.com

Iping Supriana Suwardi  
School of Electrical Engineering and Informatics  
Institut Teknologi Bandung  
Bandung, Indonesia  
iping@informatika.org

**Abstrak**—Secara teoretis, penggunaan impostor dwimatra untuk menggambarkan objek trimatra akan meningkatkan kecepatan visualisasi karena mengurangi poligon yang dibentuk dan pemanggilan fungsi render untuk setiap poligon yang dibentuk. Alih-alih digambarkan dari persamaan matematika untuk permukaan molekul, visualisasi model Solvent-Excluded Surface dilakukan menggunakan citra dwimatra tiruan bertekstur, meningkatkan potensi peningkatan performansi penggambaran molekul

**Kata Kunci**—*impostor, permukaan molekul, permukaan Connolly*

## I. PENDAHULUAN

Dalam mempelajari sifat-sifat molekul dan interaksi antarmolekul, tidak jarang bentuk ruang memberi wawasan lebih mendalam daripada sekadar struktur ataupun jenis ikatan kepada peneliti. Sebagai contoh, keaktifan enzim sering dipengaruhi oleh keberadaan molekul-molekul lain yang tidak tampak terkait tetapi memiliki kontur permukaan yang cocok. Molekul yang bersentuhan dengan enzim tadi mengubah persebaran dan posisi atom dalam enzim dan mengakibatkan perubahan aktivitas enzim tersebut. Di samping itu, banyak kasus yang menunjukkan dua molekul, yang seluruh ikatan antaratom di dalamnya sama, memiliki sifat-sifat yang jauh berbeda karena adanya perbedaan struktur ruang di antara keduanya (*stereochemistry*). Karenanya, visualisasi menjadi penting dalam disiplin ilmu kimia untuk mempelajari perilaku molekul berdasarkan bentuk ruangnya.

Penggambaran molekul pada bidang trimatra membuat molekul lebih dapat dibayangkan. Interaksi antarmolekul juga lebih mudah diteliti dan dianalisis dengan membandingkan bentuk permukaan yang ada antara molekul satu dengan yang lain. Lebih jauh lagi, peneliti dapat merekayasa interaksi antarmolekul atau hal lain terkait berbekal pengetahuan tentang bentuk ruang dan permukaan molekul, sehingga meningkatkan kemajuan ilmu pengetahuan.

Makalah ini membahas metode baru visualisasi model molekul *Solvent-Excluded Surface* menggunakan pendekatan citra semu “*impostor*” dwimatra. Pendekatan *impostor* digunakan karena citra pengganti ini diyakini memiliki potensi untuk dapat digambarkan secara lebih cepat daripada penggambaran objek trimatra yang sebenarnya. Untuk mendukung penggunaan *impostor*, digunakan pendekatan pembangunan model secara analitis sebagaimana diajukan

oleh Connolly. Kemudian digunakan shader dengan bahasa GLSL untuk penerapan *impostor* dwimatra yang dirancang.

Bagian pertama makalah ini akan membahas pengetahuan dasar terkait studi mengenai permukaan molekul yang telah dilakukan. Kemudian studi terkait metode yang tengah dikembangkan (*Solvent-Excluded Surface* dan *Impostor rendering*). Setelah itu akan dipaparkan metode yang diusulkan beserta penjelasan mengenai implementasi metode visualisasi tersebut.

## II. PERMUKAAN MOLEKUL

Usaha visualisasi bentuk ruang permukaan molekul telah berkembang sejak lama. Bentuk awalnya adalah permukaan *Van der Waals*, yang dibangun dari gambaran kerapatan elektron masing-masing atom dalam molekul dan menghasilkan representasi seperti banyak bola yang saling bersisian / beririsan. Model ini menggambarkan dasar molekul, namun tidak mampu menampilkan interaksi persentuhan antarmolekul secara baik karena hanya akan tampak seperti lebih banyak bola lagi yang bersentuhan.

Kemudian Richards[2] memperkenalkan model permukaan *Solvent-Accessible Surface* pada 1971. Model ini menggambarkan bidang yang dilalui oleh pusat molekul pelarut selama menyusuri permukaan molekul dengan model *Van der Waals*. Secara visual, model ini tampak seperti permukaan *Van der Waals* dengan jari-jari atom dalam molekul tersebut diperbesar (ditambah jari-jari molekul pelarut).

Karena dianggap belum mampu merepresentasikan permukaan sentuh dari sebuah molekul, Richards memutakhirkan model SAS-nya menjadi model SES, *Solvent-Excluded Surface*. Model ini menggambarkan bidang permukaan yang terbentuk ketika sebuah molekul pelarut menyusuri permukaan molekul target.

## III. RISET TERKAIT

### A. Model Molekul “*Solvent-Excluded Surface*”

*Solvent-Excluded Surface* terdefinisi sebagai permukaan kontak yang terbentuk antara bola (dengan jari-jari yang sama dengan jari-jari molekul pelarut) yang “menggeling” di permukaan molekul dengan atom-atom permukaan molekul tersebut [1]. SES adalah representasi yang paling umum

dipergunakan untuk *binding site analysis* dalam reaksi antarmolekul [4].

Beberapa metode telah dikembangkan untuk memvisualisasikan model permukaan molekul SES. Pendekatan analitis Connolly [2] mengambil bentuk primitif permukaan (bola dan torus) dari masing-masing bagian permukaan atom dan persentuhan antaratom. Model ruang implisit [4] membentuk persamaan bidang ruang yang mencakup setiap atom permukaan dan persentuhan antaratom. Algoritma *contour-buildup* [3] membangun permukaan SES dari busur lingkaran hasil perpotongan permukaan atom-atom SAS.

Pembangunan representasi SES didasarkan kepada 3 bentuk permukaan dasar yang menyusunnya [2, 3]:

1. **Convex face** adalah permukaan yang merepresentasikan bentuk bola dari atom-atom penyusun molekul.
2. **Saddle face** terbentuk karena posisi dua atom yang saling berdekatan sehingga molekul pelarut hanya menyentuh sebagian dari atom, namun mampu menggelinding memutar sumbu antara dua pusat atom dan membentuk permukaan seperti sadel.
3. **Concave face** adalah permukaan yang terjadi ketika molekul pelarut bersentuhan dengan tiga atau lebih atom. Pelarut tidak bisa menggelinding lagi tanpa melepas sentuhan dengan satu atau lebih atom dan menyebabkan permukaan bola terbalik.

#### B. Impostor Dwimatra

*Impostor* adalah representasi objek dalam dua dimensi yang dapat digambar lebih cepat daripada objek trimatra yang sebenarnya, namun tetap memiliki ketajaman visual objek trimatra yang asli [6]. *Impostor* mampu menggantikan model objek kompleks secara efisien dalam penggambaran dengan citra serupa objek asli yang dipetakan ke poligon transparan yang lalu digambarkan alih-alih penggambaran objek sebenarnya [5].

Metode penggambaran ruang objek dengan memanfaatkan *impostor dwimatra* memungkinkan animasi *real-time* dalam simulasi karena yang di-render adalah citra tiruan, alih-alih jala trimatra (*3D mesh*) yang rumit [7].

## IV. USULAN METODE

#### C. Model Molekul yang Digunakan

Titik tolak metode yang diajukan dalam makalah ini adalah penggunaan *impostor dwimatra* untuk meningkatkan efisiensi penggambaran objek di layar. Untuk kepentingan itu, dipilihlah metode pembangunan molekul menggunakan pendekatan analitis seperti diusulkan oleh Connolly. Pendekatan analitis dipilih karena permukaan hanya dibuat dari tiga bentuk poligon umum yang bisa langsung dibangun dari posisi atom target, jari-jari atom target, dan jari-jari molekul pelarut. Tiga bentuk templat ini menyederhanakan pembuatan *impostor* menjadi tiga bagian saja.

#### D. Impostor Rendering

Pengembangan metode ini akan dilakukan dengan menggambarkan *quad* (atau dua *triangle strips*) yang membutuhkan 4 *vertex*, kemudian akan diberi tekstur dari *shader* yang telah dibuat untuk meniru objek trimatra dari tiga wajah model Connolly. Wajah cembung (*convex face*) adalah muka luar bola, sementara cekung (*concave face*) serupa dengan muka dalam bola; ini berakibat pembuatan kedua wajah hanya berbeda di *clipping* dan nilai kedalaman. Wajah sadel (*saddle face*) dibentuk dari permukaan torus yang mengitari garis sumbu penghubung dua atom.

## V. IMPLEMENTASI

Bab implementasi mencakup dua bagian yang terpisah: prekomputasi berupa pemuatan data molekul dari berkas digital (dalam hal ini sebuah file protein dengan ekstensi .cif), dan *rendering* di layar. Contoh hasil penggambaran molekul ditampilkan dalam fig. 1.

#### E. Prekomputasi

Sebelum digambarkan ke layar, ada tiga hal yang perlu dicatat dalam memori: posisi & jari-jari setiap atom (untuk membuat *convex face*), posisi dua atom bertetangga & pelarut (untuk membuat *saddle face*), dan posisi tiga atom bertetangga & pelarut yang membentuk *concave face*.

#### F. Impostor Texturing

*Texturing* dengan *shader* ini dibagi menjadi dua: muka bola (baik cembung maupun cekung) dan muka sadel. Implementasi *shader texturing* menggunakan bahasa GLSL dalam lingkungan OpenGL.

##### 1) Muka Bola

Gambarkan sebuah *quad* berukuran diameter bola dengan pusat posisi bola dan menghadap ke *viewplane* kamera, kemudian *discard* semua fragmen "*pixel*" yang berjarak lebih dari jari-jari bola dari pusat *quad*. Selanjutnya, dicari nilai kedalaman fragmen menggunakan interpolasi kuadrat jarak fragmen dari pusat bola. Lalu warna diaplikasikan ke setiap fragmen. Untuk *concave face*, (1) bola yang digambarkan adalah pelarut yang bersinggungan dengan ketiga bola, dan (2) dilakukan *clipping* tambahan fragmen yang berada di luar segitiga yang menghubungkan ketiga pusat atom.

##### 2) Muka Sadel

Gambarkan sebuah *quad* dengan titik-titik sudut adalah persinggungan sepasang molekul pelarut dengan sepasang atom yang bertetangga sejajar dengan *viewplane* kamera. Kemudian *discard* semua fragmen yang berada dalam lingkup molekul pelarut.

Penentuan kedalaman menggunakan pendekatan lingkaran yang tegak lurus dengan bidang kamera. Diameter lingkaran adalah garis yang menghubungkan dua sisi lingkaran pelarut, melalui titik fragmen, dan tegak lurus dengan garis penghubung dua inti atom target. Setelahnya baru dihitung akar kuadrat dari jari-jari kuadrat dikurangi kuadrat jarak fragmen ke pusat lingkaran. Baru kemudian dilakukan pewarnaan dari interpolasi warna dua atom target.

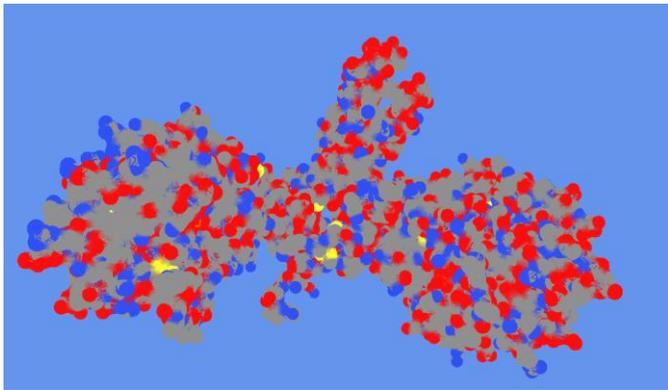


Fig. 1. Hasil *render* protein 2A45.cif

## VI. SIMPULAN DAN RISET LANJUTAN

Pendekatan *impostor* dapat digunakan untuk menggambarkan model molekul *Solvent-Excluded Surface* sebagaimana diajukan oleh Connolly, dengan tiga permukaan umum penyusun semua bagian permukaan molekul. Penggunaan *impostor* dwimatra (*quad* bertekstur) untuk menggantikan jala trimatra yang membutuhkan sejumlah besar (bervariasi) *vertex* dinilai dapat meningkatkan performansi penggambaran ke layar.

Dasar algoritma *rendering* telah dibuat. Gambaran permukaan molekul (fig. 1) belum tampak “nyata”: tidak adanya proses pencahayaan, rekayasa penggambaran bayangan/kedalaman, maupun *ambient occlusion* membuat hasil *render* terlihat sangat rata. Pengembangan selanjutnya

mencakup peningkatan realisme hasil penggambaran untuk membuat visualisasi lebih representatif, pengurangan jejak memori (*memory footprint*), penentuan atom-atom yang tidak tampak untuk mengurangi jumlah pemanggilan fungsi *render* (*occlusion culling*), serta *parallel computing* untuk meningkatkan performansi.

## ACKNOWLEDGMENT

R. P. Nugroho berterima kasih kepada Samuel C. dan M. Reza M. P. atas berbagai diskusi dan wawasan di bidang grafika komputer yang telah membantu melancarkan gagasan riset ini.

## REFERENCES

- [1] J. Greer and B. L. Bush, “Macromolecular shape and surface maps by solvent exclusion,” In Proceedings of the National Academy of Science, Jan 1978, pp. 303–7.
- [2] M. L. Connolly. “Analytical molecular surface calculation,” Journal of Applied Crystallography, vol. 16, 1983, pp. 548–558.
- [3] M. Krone, S. Grottel, and T. Ertl, “parallel contour-buildup algorithm for the molecular surface,” IEEE Symposium on Biological Data Visualization, Oct 2011, pp. 17-22.
- [4] J. Parulek and A. Brambilla, “Fast blending scheme for molecular surface representation,” IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, vol. 19, no. 12, Dec 2013, pp. 2653-62.
- [5] G. Schaufler, “Dynamically generated imposters,” GUP, Johannes Kepler Universität, Linz, Austria, 1995.
- [6] P. W. Maciel and P. Shirley, “Visual navigation of large environments using textured clusters,” Interactive 3D Graphics, 1995.
- [7] J. Yee and J. Davis, “Crowd rendering with non-planar 3D impostors,” Proceedings of the 2008 Symposium on Interactive 3D Graphics and Games, Feb 2008.